

## Моделирование взаимодействия конформационных возмущений с носителями заряда в молекуле ДНК

Семерикова Мария Андреевна

Мельников Владислав Юрьевич

Башикирский государственный университет

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н.

[semerikova.mary@yandex.ru](mailto:semerikova.mary@yandex.ru)

Проблема переноса заряда в молекуле ДНК является чрезвычайно актуальной. Интерес к этой проблеме связан прежде всего с возможностью использования цепочек ДНК в перспективных устройствах нанобиоэлектроники. Экспериментальное исследование динамики переноса заряда в ДНК началось лишь в начале 90-х годов XX в. В настоящее время проведено много различных экспериментов по переносу, интерпретации которых посвящено большое число теоретических работ.

В работе [1] теоретически показано, что при локальном внешнем интенсивном возбуждении решетки ДНК возможно образование бризеров на движущихся фронтах возникшего вследствие нелинейности решетки баббля. Эти бризеры в состоянии захватывать внешний электрон и перемещать его вдоль решетки. Характерное время существования связанного состояния «бризер-электрон» порядка 20–30 периодов осцилляций сайтов решетки. Характерная длина смещения  $\sim 20$  сайтов. Максимальная вероятность обнаружить электрон в движущемся бризере  $\sim 0.2$ .

В данной работе нами рассмотрена динамика переноса заряда в модели молекулы ДНК с учетом трения [2]. Движение описывается уравнениями:

$$\begin{cases} \ddot{U}_n = S(U_{n+1} - 2U_n + U_{n-1}) - \gamma \dot{U}_n (e^{-\beta U_n} - 1) e^{-\beta U_n} - b_n^2 A \\ \dot{b}_n = r_{n+1} + q_{n-1} b_{n-1} - (r_n + q_n) b_n \end{cases}$$

Начальное конформационное возмущение задавалось в виде солитонной пары «кинк-антикинк», центр которого приходился на 50-й сайт (Рис. 1).

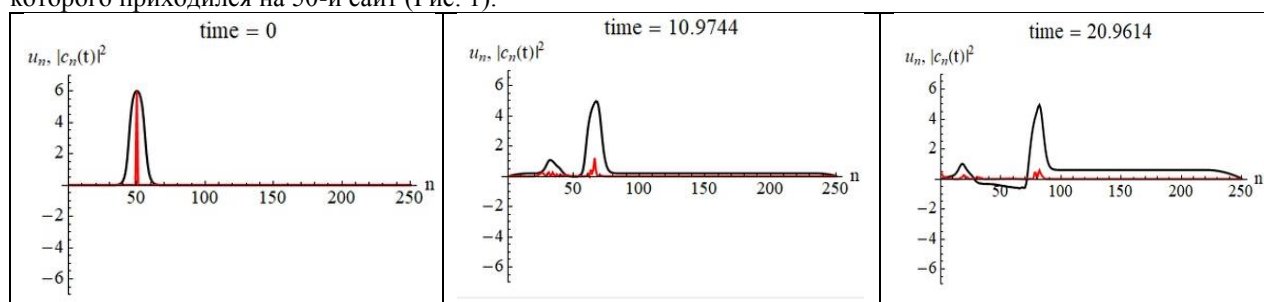


рис. 1. Прохождение заряда в различных момент времени.

Устанавливая различные значения параметра связности решетки  $S$ , а так же коэффициента трения  $\gamma$ , мы наблюдали различные картины прохождения заряда из которых можно сделать вывод, что движение заряда коррелирует с движением конформационного возмущения.

Список публикаций:

[1]. Лахно В.Д., Четвериков А.П. Возбуждение бабблов и бризеров в ДНК и их взаимодействие с носителями заряда. Математическая биология и биоинформатика. 2014. Т. 9. № 1. С. 4–19.

[2]. Закирьянов Ф.К., Мельников В.Ю. Моделирование процесса переноса заряда в молекуле ДНК. Тезисы 26-й международной конференции «Математика. Компьютер. Образование». Пуцино, 28.01.–02.02. 2019. Изд. «Институт компьютерных исследований». Москва, Ижевск, 2019. – с. 36.

## Влияние токов утечки на изменение электрического импульса при стимуляции вестибулярных нервов

Суюндукова Алмагуль Туктаровна

Национальный исследовательский Томский государственный университет

Демкин Владимир Петрович, д.ф.-м.н.

[almagul.suyundukova@mail.ru](mailto:almagul.suyundukova@mail.ru)

Вестибулярная система человека является важной сенсорной системой, отвечающей за обработку и передачу в головной мозг информации о положении тела и его перемещении в пространстве. Сенсорные устройства – волосковые клетки вестибулярной системы генерируют последовательность электрических импульсов, частота и амплитуда которых зависят от величины линейных и угловых ускорений головы. Эти